

BÀI TẬP

CƠ SỞ HÓA LƯỢNG TỬ

KHOA HÓA HỌC – TRƯỜNG ĐH KHOA HỌC TỰ NHIÊN TP. HỒ CHÍ MINH
Lưu hành nội bộ - 2014

Differentiation Formulas

- $d/dx \, c = 0$, c constant
- $d/dx \, cf(x) = cf'(x)$, c constant
- $d/dx [f(x) \pm g(x)] = f'(x) \pm g'(x)$
- $d/dx [f(x) * g(x)] = f'(x) * g'(x) + g(x) * f'(x)$ (product rule)
- $d/dx [f(x) / g(x)] = (g(x)f'(x) - f(x)g'(x)) / [g(x)]^2$ (quotient rule)
- $d/dx f[g(x)] = f'[g(x)] * g'(x)$
 OR
 for $u = g(x)$, $d/dx f(u) = f'(u) * u' = f'(u) * g'(x)$
 OR
 $dy/dx = dy/du * du/dx$ (these are all chain rule)

GENERAL

$$\begin{aligned}
 d/dx \, u^n &= nu^{n-1} * u' \\
 d/dx \, \ln u &= u'/u \\
 d/dx \, e^u &= e^u * u' \\
 d/dx \, \sin u &= \cos u * u' \\
 d/dx \, \cos u &= -\sin u * u' \\
 d/dx \, \tan u &= \sec^2 u * u' \\
 d/dx \, \arcsin u &= u' / (\text{SQRT}(1 - u^2)) \\
 d/dx \, \arctan u &= u' / (1 + u^2) \\
 d/dx \, \cot u &= -\csc^2 u * u' \\
 d/dx \, \sec u &= \sec u \tan u * u' \\
 d/dx \, \csc u &= -\csc u \cot u * u' \\
 d/dx \, a^u * u' \ln a & \\
 d/dx \log(\text{SUB } a)u &= u' / (u \ln a)
 \end{aligned}$$

SPECIFIC

$$\begin{aligned}
 d/dx \, x^n &= nx^{n-1} \\
 d/dx \, \ln x &= 1/x \\
 d/dx \, e^x &= e^x \\
 d/dx \, \sin x &= \cos x \\
 d/dx \, \cos x &= -\sin x \\
 d/dx \, \tan x &= \sec^2 x \\
 d/dx \, \arcsin x &= 1 / (\text{SQRT}(1 - x^2)) \\
 d/dx \, \arctan x &= 1 / (1 + x^2) \\
 d/dx \, \cot x &= -\csc^2 x \\
 d/dx \, \sec x &= \sec x \tan x \\
 d/dx \, \csc x &= -\csc x \cot x \\
 d/dx \, a^x &= a^x \ln a \\
 d/dx \log(\text{SUB } a)x &= 1 / (x \ln a)
 \end{aligned}$$

TABLE 4.1 ► Some Elementary Functions and Their Derivatives.*

Function, $y = y(x)$	Derivative, $dy/dx = y'(x)$
ax^n	nax^{n-1}
ae^{bx}	abe^{bx}
a	0
$a \sin(bx)$	$ab \cos(x)$
$a \cos(bx)$	$-ab \sin(bx)$
$a \ln(x)$	a/x

*In these formulas, a , b , and n are constants. not necessarily integers.

Một số hằng số và đơn vị thông dụng

$$h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

$$\hbar = h/2\pi = 1,05457 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

$$c = 2,998 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

$$m_{\text{electron}} = 9,109 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$m_{\text{proton}} = 1,673 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

$$N_A = 6,02214 \times 10^{23} \text{ hat/mol}$$

$$1\text{eV} = 1,602 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$1\text{J} = 1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2}$$

$$1 \text{ u} = 1,66 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

- 1.1** Electron cần có tốc độ bao nhiêu để có bước sóng là 3,0 cm?
- 1.2** Tính động lượng của photon có bước sóng 350 nm. Tốc độ của một phân tử hydro chuyển động bằng bao nhiêu để có cùng động lượng với proton?
- 1.3** Một hạt có tốc độ 450 Km s^{-1} . Nếu độ bất định của động lượng là 0,0100 phần trăm, thì độ bất định của vị trí là bao nhiêu?
- 1.4** Tính năng lượng cho 1 photon và một mol photon của các bức xạ có bước sóng sau:
- a.) 600 nm (đỏ)
 - b.) 550 nm (vàng)
 - c.) 400 nm (xanh)
- 1.5** Tính tốc độ của nguyên tử H (có khối lượng 1,008 u) ở mỗi trạng thái dừng ứng với hấp thụ photon ở bước sóng
- a.) 600 nm
 - b.) 550 nm
 - c.) 400 nm
- 1.6** Công thoát Φ của một kim loại là 2,14 eV. Tính động năng và tốc độ của electron bứt ra khỏi kim loại khi chiếu ánh sáng có bước sóng
- a.) 700 nm
 - b.) 300 nm
- 2.1** Tìm hàm riêng của toán tử d/dx trong những hàm sau đây
- a.) e^{ikx}
 - b.) $\cos kx$
 - c.) k
 - d.) kx
 - e.) e^{-ax^2}
- 2.2** Tìm hàm riêng và trị riêng của toán tử d^2/dx^2 trong những hàm sau đây:
- a.) e^{ikx}
 - b.) $\cos kx$
 - c.) k
 - d.) kx
 - e.) e^{-ax^2}
- 2.3** Tìm hàm riêng của toán tử d^2/dx^2 trong những hàm sau đây:
- a.) e^x

- b.) x^2
- c.) $\sin x$
- d.) $3\cos x$
- e.) $\sin x + \cos x$

2.4 Cho toán tử $\hat{X} = x$; toán tử $\hat{D} = d/dx$ và hàm số $f(x) = e^{-x^2}$. Hãy thực hiện phép giao hoán tử $[\hat{X}, \hat{D}]$

2.5 Có phải $\cos 2x$ là hàm riêng của các toán tử sau không?

- a.) d/dx
- b.) d^2/dx^2

2.6 Hàm sóng của một electron ở trạng thái năng lượng thấp nhất của ion He^+ tỷ lệ với $e^{-\frac{2r}{a_0}}$, a_0 là hằng số, r là khoảng cách giữa nhân-electron (hàm sóng tùy thuộc chỉ vào r , không tùy thuộc vào góc). Tính xác suất tương đối tìm thấy electron trong vùng không gian có thể tích là $1,0 \text{ pm}^3$ ở tại:

- a.) Nhân
- b.) cách nhân một khoảng a_0 và nhận xét

2.7 Chuẩn hóa hàm sóng $e^{-\frac{2r}{a_0}}$

2.8 Hàm nào sau đây là hàm riêng của toán tử nghịch đảo $i(x \rightarrow -x)$

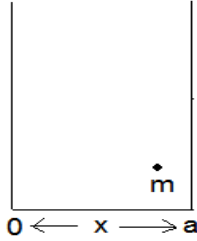
- a.) $x^3 - kx$
- b.) $\cos kx$
- c.) $x^2 + 3x - 1$

2.9 Chứng tỏ hàm $\psi = x^2 e^{-ax}$ là hàm riêng của toán tử A: $\hat{A} = \frac{d^2}{dx^2} - \frac{2}{x^2} + \frac{4a}{x}$

2.10 Các cặp toán tử sau có giao hoán không ?

	$\hat{A}$	$\hat{B}$
a)	$\frac{d}{dx}$	$(\frac{d^2}{dx^2} + 2\frac{d}{dx})$
b)	x	$\frac{d}{dx}$
c)	SQR	$SQRT$
d)	$x^2 \frac{d}{dx}$	$\frac{d^2}{dx^2}$

3.1 Xét 1 hạt có khối lượng m trong giếng thế một thứ nguyên với tường thế cao vô tận (Hình 1). Hàm sóng mô tả hệ này là:



$$\psi_n(x) = \begin{cases} K \sin \frac{n\pi x}{a} & (0 \leq x \leq a) \\ 0 & \text{(các trường hợp còn lại)} \end{cases} \quad (1)$$

$$K = \text{const.}, n = 1, 2, 3, \dots$$

a.) Xác định $K^* K = |K|^2$

b.) Chứng tỏ $\psi_n(x) = K \sin \frac{n\pi x}{a}$ & $\psi'_n(x) = W \cos \frac{n\pi x}{a}$ trực giao

c.) Viết toán tử năng lượng tổng cộng H cho hệ thống trên

d.) Chứng minh năng lượng trung bình của hệ $E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}$ là kết quả của

$$\bar{E}_n = \langle E_n \rangle = \int_0^a \psi^* \hat{H} \psi dx$$

e.) Tìm vị trí trung bình của hạt ? vị trí này có tốt để tìm thấy hạt không ? nếu hạt ở mức năng lượng E_2

3.2 Định nghĩa hàm riêng, trị riêng của một toán tử, $\hat{A}$. Chứng minh rằng nếu ψ là hàm riêng của $\hat{A}$, thì cũng là hàm riêng của $\hat{A}^2$

3.3 Chứng tỏ e^{ikx} là hàm riêng của toán tử động lượng $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$, tìm trị riêng tương

ứng. Sau đó chứng tỏ e^{-ax^2} không là hàm riêng của toán tử p .

3.4 Carbon nanotubes là những ống hình trụ rỗng của nguyên tử carbon. Là chất dẫn điện rất tốt có thể được sử dụng như dây điện trong các thiết bị nano. Các ống này có đường kính khoảng 1-2 nm, chiều dài L khoảng vài μm . Một nanotube carbon dài có thể mô phỏng như cấu trúc một thứ nguyên. Ở dạng đơn giản, các electron của nanotube có thể mô tả bằng hàm sóng có dạng $\sin \pi x / L$ (L là độ dài của nanotube).

a.) Tìm hàm sóng chuẩn hóa

b.) Tìm giá trị trung bình của vị trí electron trong nanotube

3.5 $\sin x$ và $\sin 2x$ là hàm riêng của toán tử động năng. Chứng tỏ 2 hàm này trực giao.

4.1 Hàm sóng của một electron ở trạng thái năng lượng thấp nhất của ngử hydro tỷ lệ với e^{-r/a_0} , a_0 là hằng số, r là khoảng cách giữa nhân-electron (hàm sóng tùy thuộc chỉ vào r , không tùy thuộc vào góc). Hãy chuẩn hóa hàm sóng này.

4.2 Tính bán kính r của nguyên tử hydro ở trạng thái 1s. Biết hàm sóng 1s chuẩn hóa, có dạng theo sau (a_0 : bán kính Bohr).

$$\psi_{1s} = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right)\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0} = \psi_{1s}^*$$

4.3 Cho electron với các số lượng tử: $n = 2, l = 0, m = 0$. Tính mật độ xác suất tại nhân

4.4 Tính bán kính trung bình của vân đạo 1s của nguyên tử giống H theo 2 cách:

a) Áp dụng công thức tổng quát

$$r_{nl} = n^2 \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\ell(\ell+1)}{n^2} \right) \right\} \frac{a_0}{Z}$$

b) Bằng tích phân, biết:

$$R_{10} = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

4.5 Tính bán kính trung bình của vân đạo nguyên tử giống H:

a) 3s tính bằng tích phân, biết

$$R_{3s} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{2Zr}{3a} + \frac{2Z^2r^2}{27a^2} \right) e^{-Zr/3a}$$

b) 3p tính bằng công thức tổng quát (4.4 b)

4.6 Tính xác suất tìm thấy electron 1s của nguyên tử H trong hình cầu có $r = 0,05 \text{ nm}$?

Cho hàm bán kính của nguyên tử H ở trạng thái cơ bản là

$$R_{1s} = 2 \left(\frac{1}{a} \right)^{3/2} e^{-r/a}$$

4.7 Tìm vị trí nút của hàm sóng sau:

$$\psi_{310}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{81} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(6 \frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0^2} \right) e^{-r/3a_0} \cos \theta$$

4.8 Chuẩn hóa hàm sóng sau trong tọa độ cầu:

a) $e^{-r/2a_0}$

b) $(r/a_0) e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{+i\varphi}$

4.9 Dự đoán cấu trúc điện tử ở trạng thái cơ bản của Mg ($Z=12$), Y, Ce, O và O^{2-} .
Và dự đoán số oxy hóa có thể có.

4.10 Các số lượng tử của electron thứ 58 trong Ce, và electron thứ 8 trong O?

4.11 Viết toán tử H và hàm ψ ở dạng định thức Slater cho nguyên tử Carbon ($Z=6$)